

人工智能在核燃料及材料领域的应用现状和发展趋势

张 涛, 焦拥军, 刘振海, 邱 玺, 向羿龙, 黄好越, 兰 峻, 辛 勇, 李垣明

(中国核动力研究设计院 先进核能技术全国重点实验室, 四川 成都 610213)

摘 要: 随着人工智能 (artificial intelligence, AI) 的飞速发展, 其在核燃料及材料领域的应用正逐渐成为推动核能科技进步的新动力。本文全面回顾了AI在核燃料及材料领域的研究现状, 并对未来的发展趋势进行了深入分析。首先介绍了应用于科学研究的AI方法, 分别从网络架构和学习范式2个方面展开论述。其次系统总结了AI在材料级和整体级的性能预测、材料和结构的设计优化和燃料生产运行过程的视觉任务3个方面的应用现状。随后展望了AI与核燃料及材料结合的未来发展趋势, 在算法层面, 讨论了提升机器学习模型的可解释性、量化不确定性的方法, 以及有限监督学习技术在减少数据需求方面的重要性; 在应用层面, 讨论了多尺度多物理场仿真加速、拓扑优化与生成式设计、核材料性质通用预训练模型, 以及自动化实验室等关键技术。最后为进一步促进AI在核燃料及材料领域的应用提出了几点建议。

关键词: 核燃料及材料; 人工智能; 深度学习; 核燃料性能预测; 设计优化; 机器视觉

中图分类号: TL99

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2025)07-1882-13

1 引言

随着科学技术的发展, 人工智能 (artificial intelligence, AI) 特别是其中的深度学习技术取得了前所未有的巨大突破, ChatGPT、Stable Diffusion、Gemini 和 Sora 等生成式模型的出现对现代社会生活产生了颠覆性的改变, 未来也将深刻影响人类文明。AI 具有强大的非线性拟合以及高效的正向推理能力, 将 AI 与科学研究融合, 引发了科研范式的第 5 次变革, 即科学智能 (AI for Science)^[1]。科学智能的目的是加速科学研究, 目前已经在航空航天^[2]、天气预测^[3]和石油^[4]等众多科学领域取得了重大的进展, 使其成为引领新一轮科技革命和产业升级的核心驱动力之一。在这样的时代背景下, 将 AI 与传统工业领域相结合, 以诞生一系列如 AlphaFold^[5]、DeePMD^[6]和盘古大模型^[3]等突破性成果是各行各业科技工作者的研究热点。随着全球经济的快速发展, 减少高碳资源消耗和温室气体排放受到世界范围内的倡导。在各种清洁能源中, 如风能和太阳能因其波动性和间歇性导致能源供应不稳定, 而核能因其稳定性可作为电网的基础负荷以保证电力的稳定供应。然而核能的发展相对缓慢, 每一代反应堆的迭代往往需要数 10 年的时间, 其中制约核能发展的关键因素之一就是核燃料及材料的研发。将新质生产力 AI 和传统核燃料行业相结合, 开启核燃料设计研发新范式, 将有望推动核能更好更快地

发展。

核燃料及更大范围的科学和工程中存在 3 类基本任务: (1) 科学发现: 通过实验获取数据以挖掘潜在的物理规律, 从而得到整个系统的物理模型; (2) 科学仿真: 通过建立的物理模型进行数值仿真, 得到系统在更多状态下的行为; (3) 科学设计: 基于物理模型仿真的结果对系统进行反向设计和控制。AI 在这 3 方面都能发挥作用。在科学发现方面, AI 能帮助进行假设构建、实验设计和数据收集与分析, 建立自动化实验室以加快核燃料研发进程; AI 还能用于挖掘核材料数据间的复杂映射关系, 发现新的机制^[7]。在科学仿真方面, 核燃料的仿真是一个多物理场、多尺度问题, 利用 AI 能加速不同尺度的核燃料性能仿真: 在微观尺度, 通过 AI 建立高精度势函数, 能以第一性原理精度进行大规模分子动力学模拟; 在介观尺度, 利用 AI 能加速相场模拟, 实现微观组织演化的快速预测; 在宏观尺度, 利用 AI 能加速燃料元件辐照-热-力性能预测, 实现堆芯级的快速评价以及核电站燃料性能在线监测。在科学设计方面, 燃料元件和上下管座等燃料组件典型部件的优化涉及辐照、热、流、固等多物理场, 数值方法计算量大, 目前一般采用参数优化的方法, 其优化空间小。而未来随着增材制造技术的发展, 堆芯的设计可以不必拘泥于规则的几何, 而结合 AI 技术将有助于探索更宽广的设计空间, 得到更优性能的设计。

收稿日期: 2024-10-25

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (U2067221); 国家自然科学基金 (12205285); 四川省杰青项目 (24NSFJQ0248)

作者简介: 张 涛, 男, 2000 年生, 硕士生, 中国核动力研究设计院先进核能技术全国重点实验室, 四川 成都 610213, 电话: 028-85900135, E-mail: taozhan22@gmail.com

目前已有的AI在核领域的综述大多集中在核电站运维和燃料管理优化^[8-9],针对核燃料领域的综述也只聚焦于材料设计制造^[10],缺乏AI在整个核燃料产业链应用的综述。此外,ChatGPT引发了新一轮深度学习研究的热潮,目前的综述也缺乏前沿人工智能技术的应用现状。

为此,本文首先介绍用于科学问题的人工智能方法,重点讨论当前的研究热点——深度学习。其次凝练材料研发、设计制造到入堆服役等核燃料产业链的共性AI应用,从性能预测、设计优化和机器视觉3个方面,总结AI在核燃料及材料领域的应用现状。最后将基于其它领域AI的前沿进展并结合核燃料及材料领域当前的研究现状,进一步讨论未来应用AI的发展趋势。

2 用于科学领域的AI方法简介

人工智能一般是指使计算机具有类似人类智能的能力,如学习和推理等。人工智能涵盖多个方向:问题求解,知识、推理和规划,不确定知识和不确定推理,机器学习,沟通、感知和行动^[11]。在科学与工程领域,问题求解和机器学习尤为重要。问题求解通常指的是在给定一个问题的情况下,如何高效地搜索并找到该问题的最优解,这类问题在工程实践中极为常见。在核工程领域,由于核能系统的复杂性,需要解决的问题往往涉及多目标优化。目前,大多数研究倾向于采用元启发式优化算法来解决这类多目标优化问题。这些算法通过模拟自然现象或物理过程来寻找最优解,例如遗传算法、粒子群优化和模拟退火等^[12-13]。

机器学习是当前人工智能的主要研究方向。机器学习任务可以分为监督学习和无监督学习2类,监督学习需要输入和与输入对应的标签,通过学习建立输入特征到标签的映射关系,进一步又可分为回归和分类任务;无监督学习只需要输入特征,可执行数据分类或降维等任务。机器学习目前已经发展出了多种算法,但对于特定任务,挑选合适的算法及其超参数通常是一个繁琐的过程。近年来自动化机器学习技术的发展大大简化了这一过程。如Google推出的Autogluon^[14]自动化机器学习建模库,使用者仅需准备训练数据,按照接口导入数据即可自动化模型建模与参数调整,模型评估,模型预测与解释。

统计机器学习至今已经获得长足的发展,其背后有较强的理论知识支撑。随着数据量的与日俱增和计算机软硬件条件的发展,深度神经网络从众多机器算法中脱颖而出,成为机器学习的研究热点。针对问题特点从多层感知机(MLP)逐步发展出了各种类型的深度学习模型^[15]。卷积神经网络(CNN)引入了空间上的卷积操作,用于处理具有类似规则网格结构的数据;循环神经网络(RNN)引入了时间上的权重共享和隐状态,用于处理序

列数据;MLP、CNN、RNN输入的数据一般是欧几里得类型的,用固定大小的矩阵储存。但现实世界中大部分数据类型通常是非欧几里得,比如社交网络,分子结构和非结构网格等,其需要用节点和边组成图来表示。为此提出了图神经网络,其引入了图上的卷积操作,用于处理图结构数据。为了解决RNN难以捕捉数据长程关联的问题,进一步提出了Transformer架构,其引入了注意力机制,最初用于文本数据上的序列到序列学习,但后来也被进一步推广到图像和图结构上,并且是ChatGPT等大模型的核心技术之一。此外,为了处理科学和工程中的偏微分方程求解问题,目前提出了一类神经算子网络,旨在实现巴拿赫空间上函数和函数的映射,相关研究有DeepONet^[16],FNO^[17]和KNO^[18]。

以上所介绍的深度学习架构是指处理数据的网络,进一步则是如何用神经网络建模科学问题,称之为范式。本文将建模科学问题的深度学习范式分为4类:物理指引、自回归、强化学习和生成式人工智能。不同的范式可以采用相同的网络架构,也可以相互组合以更好地完成任务。物理指引指基于物理背景和先验知识,通过施加不同程度的物理约束来增强模型性能^[19]。物理指引机器学习集成了数据驱动和物理驱动的优点,不仅能提升模型的可解释性,还能降低数据量的需求。一般存在3种策略^[20]:(1)物理信息损失函数。该思想来源于物理信息神经网络^[21],将方程作为软约束加入损失函数中。(2)物理信息网络架构。物理系统可能满足如置换、平移或旋转这样的不变性或等变性^[22],设计神经网络天然满足这些性质将显著减少数据的需求。(3)物理信息预训练。在一个具有物理规律的数据集预训练模型,然后再用实际观测数据进行微调,提升模型在更广泛数据集的泛化性。自回归在科学领域中广泛应用于解决时空动力学问题。这种方法的核心思想在于,通过神经网络学习物理系统从当前状态到下一步状态的演化规律。通过迭代推理过程,可以预测系统状态随时间的演化^[3-4]。强化学习一般用于科学问题中的优化问题,将优化目标作为奖励函数,通过与环境的多轮交互最大化奖励函数得到最优的决策或设计变量^[23-24]。生成式人工智能则是将科学的仿真、设计或控制问题视为一个概率分布建模问题,一般采用目前广泛应用的扩散模型^[25]。在仿真任务中,由于生成模型的生成过程是逐步实现的,相较于一步预测的代理模型鲁棒性更强;在设计或控制任务中,在生成过程加入设计或控制目标引导生成过程,能在保证物理一致性的时候引导模型生成更优的设计或控制^[26]。

3 人工智能在核燃料与材料领域应用现状

核燃料及材料产业链涉及核燃料与材料、元件、组件

的设计研发、核燃料组件的生产制造、核燃料组件的入堆服役以及乏燃料的后处理。在设计研发中, AI可以预测材料从微观到宏观的性能, 对材料和机械结构进行优化设计; 在生产制造过程中, AI可以替代人工进行视觉检测; 在燃料入堆服役过程中, AI可以在线预测燃料棒服役性能, 在换料时可以进行燃料组件的定位; 在乏燃料后处理过程中, AI可以预测乏燃料的性能和设计处理乏燃料的材料。可将这些任务大致分为3类: 核燃料性能预测、设计优化以及核燃料生产和运行过程中用到的机器视觉。本节从这3类任务分别开展AI应用现状的论述。

3.1 核燃料性能预测

将核燃料性能预测分为材料级性能预测和整体级性能预测。材料级性能预测指的是材料模型建模, 如通过实验数据建立热物性和力学性能的预测模型以及通过第一性原理仿真数据建立深度势能模型, 如图1a和图1b^[27]所示。整体级性能预测指核燃料及材料服役过程中的宏观热力学性能预测, 如图1c所示^[28]。

3.1.1 材料级性能预测

传统材料模型建模方法一般采用实验生成数据, 通过最小二乘法、参数优化等算法结合物理模型建立经验或半经验公式, 如用于轻水堆核燃料分析的材料属性手册 MATPRO^[29]积累了大量核燃料和包壳材料的模型和数据。由于机器学习有强大的非线性拟合能力, 通过机器学习模型能建立更为精确的材料模型, 目前在核燃料

及材料的热物性、辐照微观结构、力学行为和腐蚀等方面均开展了研究。

在热物性方面, 由于核燃料的热导率行为受燃耗、气孔率和温度等多方面影响, 行为较为复杂, 目前开展了较多研究。Lu等^[30]使用神经网络和随机森林等机器学习技术建立了金属核燃料热导率的预测模型, 并通过皮尔逊相关系数筛选影响热导率关键特征。Kautz等^[31]根据辐照实验数据使用MLP网络建立了辐照U-Mo合金的热导率和合金元素浓度、燃耗、裂变密度、裂变功率、热通量、中子通量以及温度的关系。

在辐照微观结构研究方面, Cai等^[32]利用决策树算法分析了中子辐照下U-10Zr金属核燃料的气泡分布、元素迁移和热导率退化问题。其通过扫描电子显微镜的图像提取了19000个气泡的18个关键特征作为神经网络的输入, 利用这些特征决策树能自动检测和分类气泡, 并揭示其对元素迁移和热导率退化的影响。

在材料力学行为方面, 目前开展了大量研究。在材料蠕变行为方面, Yang等^[33]通过XgBoost模型建立ODS钢基体晶粒形态、分散形态和氧化物相等输入特征对蠕变断裂寿命和屈服、断裂强度的影响。Dutta等^[34-35]使用了线性回归和神经网络技术对Zr-2.5Nb合金的蠕变曲线进行了建模, 线性回归方法无法准确预测蠕变的不同阶段, 而神经网络能高精度地模拟3个蠕变阶段。Zhang等^[36]整合了奥氏体不锈钢的疲劳、蠕变数据, 应用机器学习

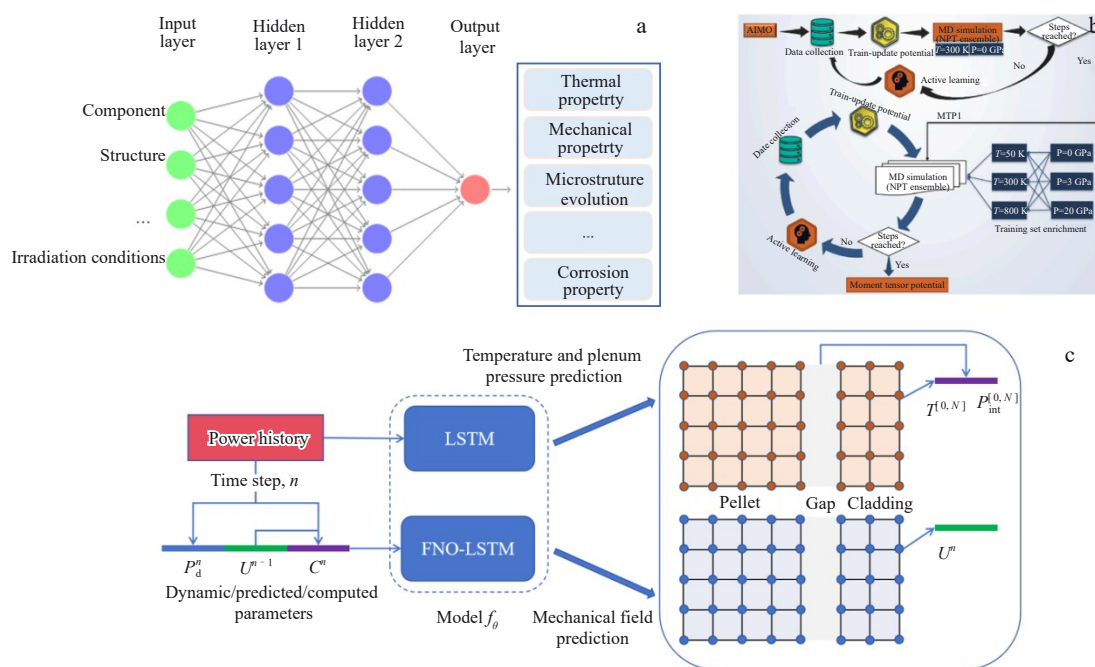


图1 人工智能应用于核燃料性能预测

Fig.1 AI for predicting nuclear fuel performance: (a) material-level performance prediction based on experimental data; (b) material-level performance prediction driven by deep potential^[27]; (c) structural-level thermal and mechanical performance prediction of fuel element under irradiation^[28]

习算法建立了其寿命预测模型。Sai 等^[37]用 Xgboost 和神经网络方法建立了铁素体/马氏体钢管在堆内中子辐照蠕变下的直径应变预测模型。在辐照肿胀方面, Korotaev 等^[38]开发了一个神经网络模型, 能根据材料成分、辐照条件及温度等多个因素, 预测奥氏体不锈钢在快中子辐照下的肿胀行为。Jin 等^[39]使用基于梯度提升的集成方法预测材料辐照引起的空洞肿胀起点, 并识别出影响肿胀的主要因素, 如温度、铁和铬的含量以及中子注量。在磨蚀方面, Baydoun 等^[40]使用神经网络对 34NiCrMo16 合金磨蚀行为进行了建模并与基于公式的模型进行了对比, 并探究了数据量对模型性能的影响。此外, Park 等^[41]利用 2 种锆合金的拉伸试验数据、机制模型以及机器学习模型推导出这 2 种锆合金的失效准则, 用于评估乏燃料包壳在运输过程中的完整性。Zhang 等^[42]采用决策树算法建立了铀和铀合金氧化腐蚀后力学性能的预测模型, 包括屈服强度、抗拉强度、延伸率和截面收缩率。

在包壳腐蚀方面, Zhang 等^[43]采用神经常微分方程 (Neural ODE) 建模锆合金的腐蚀速率, 通过模型和数据融合的方法克服了数据在时空分布稀疏的问题。结果表明, Neural ODE 模型的精度比半经验公式提高了 25%, 并表现出良好的泛化性。

由于堆内辐照的复杂性和测量手段的有限性, 只有燃料棒的少数性能数据可以通过实验测得。而随着计算材料学的发展, 研究人员可在各个尺度上模拟核燃料及材料的性能, 减少了对昂贵实验设备和原材料的依赖, 显著降低研发成本。因此通过仿真计算数据建立材料模型是预测材料性能的另一种手段。相关研究如 Craven 等^[44]利用机器学习技术预测了二氧化铀和氮化铀的扩散系数, 其数据集来自收集的历史文献数据和原子尺度的团簇动力学模拟数据。Hasan 等^[45]采用贝叶斯的高斯过程回归方法预测了氢化锆合金的断裂概率, 其数据集由 210 个代表性微结构特征的有限元模拟结果组成。Che 等^[46]使用实验数据改进裂变气体释放模型, 采用主成分分析 (PCA) 对裂变气体释放的时间序列进行降维, 使用克里金方法建立代理模型降低计算成本, 并将其纳入 BISON 程序中实现了相似的精度和更高的效率。Dhulipala 等^[47]采用了一种结合主动学习、多保真建模和子集模拟的方法建立了 TRISO 核燃料的可靠性评估方法, 显著降低了模型调用高保真模拟的次数。Zhao 等^[48]使用 LSTM 网络建模弥散 UO_2 燃料的辐照肿胀行为, 并将机器学习模型嵌入有限元计算框架中, 实现了高效率的多尺度模拟计算。辐照肿胀模型的训练数据来源于扩散方程、晶界气泡方程的数值计算结果。

计算材料学还能够深入到原子和分子层面, 提供实验手段难以触及的微观结构信息。对于微观尺度材料性

能计算, 特别是从头算分子动力学, 长期以来受到计算量庞大这一瓶颈的制约。通过从第一性原理计算产生的大量数据中学习, 可以构建出能够以较低计算成本预测材料行为的原子间势能模型, 从而进行大规模的从头算分子动力学仿真。

在陶瓷核燃料方面, Dubois 等^[49]开发了用于二氧化铀 (UO_2) 的机器学习原子间势能, 使用带有 Hubbard U 修正的密度泛函理论 (DFT+U) 计算来构建训练集, 并通过主动学习过程丰富了训练数据库。而 Stippell 等^[50]进一步结合迁移学习技术减少了高精度 DFT+U 数据的需要。Wang 等^[51]开发出基于 α 铀的矩张量势 (MTP), 该模型相较于传统势能模型在晶格动力学和弹性属性预测上具有更高的准确性。Chen 等^[52]进一步将其扩展到铀的其他相变状态, 如 β 、 γ 、hcp 和 fcc 相。Kruglov 等^[53]使用进化算法和机器学习加速的分子动力学得到了铀在极端条件下的 P-T 相图。在二氧化钍的研究中, Kobayashi 等^[53]运用机器学习分子动力学模拟了其熔化过程, 还揭示了一种由氧原子扩散引发的异常相变。

在金属铀燃料的模拟中, Hao 等^[54]以低压条件下铀金属的动态行为作为研究对象, 利用球形-切比雪夫基描述符和大量第一性原理计算数据, 构建了神经网络势能函数准确预测了铀金属的晶格常数、弹性常数和空位形成能。

在金属材料方面, Wang 等^[55]将 ZBL 势能与新开发的深度学习势能模型平滑插值, 可以用于新型先进材料如高熵合金和碳化物的辐照效应研究。Ladygin 等^[56]应用机器学习方法, 通过主动学习策略减少了 DFT 模拟的次数, 开发了用于 Al、Mo、Ti、U 4 种材料晶格动力学性质计算的势能。Yang 等^[57]的研究结合了 DFT 和 SNAP 机器学习势能, 为研究钼铌合金的高温力学性质提供了一种有效的手段。Koskenniemi 等^[58]使用机器学习势能进行高效的原子级模拟以研究辐照对钨和钨钼合金的损伤, 并进一步基于机器学习模型开发其查找表以加快分子动力学模拟。

在乏燃料方面, Qi 等^[59]使用深度势能方法, 为 LiCl-KCl-LiF 体系训练了一个高精度的原子间势能模型, 并研究了 LiCl-KCl 和 LiCl-KCl-LiF 熔盐体系的局部结构、热物理性质和输运性质。Feng 等^[60]在温度 1200~1500 K 下, 使用深度势能进行了分子动力学模拟以研究熔融 LaCl_3 的微观结构演变。Wang 等^[61]使用机器学习、第一性原理计算和动力学速率理论来设计用于核废料固化的陶瓷材料。

总之, 通过 AI 技术能从实验数据或仿真数据中建立更为精确的材料模型。但是当前数据驱动的机器学习材料模型因其黑盒属性限制了进一步的应用, 未来可考虑建模时集成更多的物理信息增强可解释性或使用不确定

性分析技术量化其不确定性,最终将机器学习材料模型纳入更高尺度的核燃料性能分析程序中。此外,人工智能有望在发现新的物理规律方面发挥更大作用,尤其是在微观和介观尺度的材料辐照行为研究中。

3.1.2 整体级性能预测

建立材料级性能预测模型后,进一步是将其集成到宏观程序,进行核燃料的辐照-热-力学行为分析。目前应用广泛的燃料棒性能分析程序一般采用 1.5 维简化,但压水堆中有上万根燃料棒,但即使是简化程序在堆芯级燃料棒性能评价、堆芯燃料-物理-热工多专业耦合和核电厂燃料棒性能在线监测等场景下都需要提高计算的效率,目前基于 AI 已经开展了相关的研究。

洪亮等^[62]分别基于 k 近邻、决策树和 AdaBoost 集成算法预测准稳态下燃料棒包壳外表面和芯块中心温度。王东东等^[63]基于多层感知机训练模型预测中国实验快堆燃料包壳峰值温度。Wu 等^[64]使用径向基神经网络预测铅铋快堆包壳外表面峰值温度。上述研究只局限于峰值温度这一指标,且没有分布信息。而刘振海等^[65]将先验信息嵌入网络架构的设计,实现了准稳态下燃料温度的时空分布预测,其建立的代理模型不仅比数值程序快约 204 倍,还具有很高的精度。

以上研究只局限于温度性能的预测,研究者进一步开展了力学相关性能预测研究。Wei 等^[66]基于 230 个实验数据使用径向基神经网络预测反应堆的 PCI 失效概率。其输入特征为功率跃升增量、当前燃耗和最大功率,输出为失效概率。但数据的瞬态类型和输入特征比较单一,限制了其更大范围的应用。Wang 等^[67]基于燃料棒在多种瞬态工况下 2000 万条仿真数据建立了 PCI 指标中的应变能密度预测模型。其优点在于模型预测精度高,其缺点在于需要使用燃料棒性能分析程序先计算出稳态运行的状态,没有实现端到端的预测。Che 等^[68]构建了较为全面的燃料棒准稳态性能的代理模型,包括:燃料温度、内压、包壳氧化膜厚度、包壳氢浓度、包壳的环向应力、包壳的环向应变、应力腐蚀开裂导致的棒失效风险和芯块表面缺陷导致的棒断裂风险。结果表明,代理模型在未观测到的标准堆芯和高燃耗堆芯上都显示出不错的预测能力,但最大的预测误差较大。Zhou 等^[69]开发了一种深度异构联合框架,将时间卷积神经网络和傅里叶神经算子结合,实现了准稳态下燃料中心温度、内压、氧化膜厚度和间隙宽度等物理量的时序演变预测,但缺乏力学信息的预测。为了解决当前代理模型预测力学误差大,缺乏时空分布信息的问题,Zhang 等^[28]开发了混合傅里叶神经算子用于预测准稳态下燃料热学和力学的时空演变性能。该方法可扩展性好,能实现不同循环长度、功率史的燃料棒性能预测。此外其在训练数据外的真实堆芯数据预测精度较高,进一步与仅预测极值的机器学习

模型相比,体现出了更好的精度和泛化性。

以上研究大多从设计阶段对燃料棒的服役性能进行预测,但电厂实际运行时,会通过传感器监测堆芯的物理状态,因此也可以结合电厂运行数据预测燃料的性能。Ross 等^[70]开发了一种基于图拉普拉斯算子的机器学习模型,将已知点的温度历史和燃料棒位置图的拉普拉斯矩阵特征向量输入到神经网络,可预测未知位置或时间的温度。其训练数据来源于虚拟高温试验设施,用于模拟高温气冷堆的热传导过程。

总之,利用机器学习模型建立燃料性能程序的代理模型,可以显著提高燃料辐照-热-力学性能的预测效率。然而,目前的研究大多集中在预测燃料性能的极值且预测性能单一,未来应推广到更多的燃料性能,并实现时空分布的预测。同时,由于燃料在堆内的行为极为复杂,现有的大多数模型仅能预测稳态条件下的性能,且预测的最大误差较大。未来的研究应该扩展到瞬态工况,并研究更先进的算法来进一步减少预测误差。此外,目前的研究数据来源较为单一,没有充分利用设计和运行阶段的数据。未来的研究可以考虑采用数据同化技术,整合数值模型和电站实际测量数据,以期获得更准确的预测结果。

3.2 设计优化

核燃料及材料领域的优化问题通常是一个多目标优化问题,需要在约束下优化多个设计变量得到更优的性能。设计优化需要得到设计变量和设计目标的关系(评价函数),一般可以通过数值计算和实验获得。目前大部分研究采用启发式算法进行优化,但启发式优化算法需要大量调用评价函数,在高保真数值求解器和实验场景下的应用存在困难。通常的方法是基于已有的仿真或实验数据建立代理模型,采用优化算法对代理模型进行优化获得最优设计。在核燃料及材料领域,设计优化不仅涉及材料设计,如提升燃料的热导率和包壳在高温及辐照环境下的性能,也包括结构设计,比如优化燃料元件的峰值温度和应力,以及下管座等部件的压降和过滤性能。

3.2.1 材料设计

传统的核材料设计方法依赖大量实验,耗时且成本高昂,而机器学习技术可以揭示材料成分、组织和性能之间的复杂关系,显著加速新材料的发现和设计过程^[71]。

相关研究如 Yan 等^[72]使用机器学习方法构建了 UO_2 -Mo 复合材料结构和热导率的映射关系,最后实际制备出的复合燃料芯块热导率比纯 UO_2 高约 20%。Tan 等^[73]采用数据重构和网络结构优化技术,成功设计并实验验证了 308 种新的(CuNiMn)-X 高熵铜合金。He 等^[74]采用机器学习模型,结合高通量模拟和实验筛选,预测并制造出具有期望性能如弹性常数、硬度、高温强度和疲劳性能的高熵合金。Wen 等^[75]研究者开发了一种创新策略,将机

机器学习模型与实验设计算法相结合,以少量的实验进行了更广泛的设计探索,成功的发现了硬度比原始数据集高出10%的合金。Bai等^[76]利用深度学习技术对ODS合金的组分进行优化,以增强其抗拉强度和延伸率。用类似的方法,Bai等^[77]还进行了奥氏体不锈钢辐照肿胀性能以及Mo基合金高温下的抗拉强度的改善^[78]。在工艺方面,张雪伟等^[79]通过机器学习辅助设计U-Mo合金的等温分解参数,成功确定了合金的最佳工艺参数,使得合金硬度和粉末率达到最高。陈晨等^[80]通过集成学习和粒子群优化算法优化了碳化硅陶瓷微封装燃料芯块的烧结工艺,并用实验验证在该工艺参数下能够获得接近理论密度的高致密度烧结体。

总之,AI能够揭示材料组分、工艺与性能之间的复杂映射关系,从而加速核燃料及材料的设计和研发进程。目前,多数研究依赖于现有的实验数据,利用机器学习模型来建立从材料组分到性能的映射,并运用优化算法寻找最优的材料组分。然而,由于数据的质量和数量限制,这种方法可能无法保证得到最佳设计。未来研究应进一步整合实验设计与机器学习,以更高效地利用有限数据探索更广阔的设计空间^[75]。同时,核燃料及材料的制造工艺对最终性能存在显著的影响,未来应进一步考虑工艺因素。此外,应当将数值模拟和实验数据相结合以更好的设计材料。

3.2.2 结构设计

燃料的结构设计一般包括燃料元件的设计和燃料组件相关结构的设计。目前对多种类型燃料元件均开展了设计优化研究。在棒型燃料元件方面,Taheranpour等^[81]利用遗传算法对燃料棒的内压、间隙厚度、包壳厚度以及燃料棒长度等参数进行了优化,通过燃料性能程序计算目标函数,成功将燃耗提高了12%,反应堆的安全裕度提升了7%。Ghasabian等^[82]通过人工蜂群算法将VVER核电站燃料棒的初始内压优化为0.467 MPa,不仅能提高燃耗,还降低了温度。其还利用遗传算法和人工蜂群算法开展了WWER-1000反应堆燃料芯块的中心孔径优化工作^[83],不仅显著的改善了平均芯块温度,延长了循环长度,还提高了燃耗。在板型燃料元件方面,Tan等^[84]使用遗传算法等多目标进化算法,对板燃料的厚度参数进行了优化,获得了最优的热工和力学性能。Barati等^[85]采用元胞自动机和准模拟退火技术对板的厚度和高度进行了优化,在满足最大许用应力和非负尺寸的约束下最小化了板的质量和形变,且相较于遗传算法和神经网络方法更高效。在弥散燃料方面,Zhang等^[86]使用遗传算法等多目标优化算法,对基于TRISO颗粒的弥散微封装燃料辐照下的性能开展了优化设计。通过调整TRISO颗粒间距和燃料颗粒的几何参数,改善了燃料的热传递性能和力学性能。在绕丝燃料方面,Raza等^[87]通过结合三维

计算流体力学(CFD)和克里金元建模技术,进行了绕丝燃料组件的形状优化以改善热传递、减少摩擦损失,最终得到了线圈直径与间距的最优值。

在燃料组件相关结构中,定位格架和下管座开展了较多研究。Leite等^[88]应用粒子群优化算法优化定位格架的弹簧设计,成功得到了具有最小应力和特定刚度值的弹簧和凹槽几何形状。Wan等^[89]提出了一种基于双层近似模型的下管座可靠性并行优化多学科设计方法。该方法与传统的顺序优化和可靠性评估方法相比,在流阻和流速均匀性指数方面取得了显著改善,并显著提高了可靠性。

为了进一步提高反应堆的性能,燃料结构的设计将不局限于规则的几何,可以探索更复杂的结构进一步提高反应堆的性能。Sobes等^[90]使用高斯过程算法对异形几何反应堆进行了设计和优化。其优化流程包括内部和外部循环,内部计算循环采用蒙特卡洛软件MCNP和CFD软件STAR-CCM+分别进行中子物理和热工流体计算生成数据。外部优化循环中开发了基于高斯过程的中子和热工流体的代理模型。最终优化的结果将温度峰因子降低到原来的1/3,并显著减少维持反应堆临界功率水平所需的燃料体积。

总之,目前许多研究倾向于使用启发式优化算法来优化结构参数。然而,启发式算法往往需要多次评估评价函数,这在计算成本较高的问题上可能不太适用,一般通过机器学习技术来构建评价函数的代理模型以加速搜索过程。但最近的研究表明,基于代理模型的方法有时会导致对抗性或物理上不一致的设计结果。因此,未来的研究可以探索引入生成式人工智能技术,以期获得更可靠的优化结果^[26]。

3.3 机器视觉

随着现代生产线的高速运转和精密需求日益增加,传统的人工检测和定位方法逐渐显现出效率低下、易疲劳、实时性不足等缺陷,难以满足核燃料制造的严格要求。机器视觉技术作为一种集成了光学设备、非接触式传感器和先进图像处理算法的智能化手段,逐渐成为人工方法的有效替代。本节将重点介绍机器视觉在核燃料制造中的2个关键应用:检测和定位。

3.3.1 机器视觉检测

燃料组件制造过程中,芯块生产、燃料棒组装、燃料组件组装等很多环节涉及外观检测。机器视觉系统通过自动接收、处理和解析真实物体的图像信息,具备自动化、高精度的特性,逐渐成为人工检测的有效替代方案。目前在核燃料制造领域中,机器视觉检测技术已在燃料棒表面缺陷检测和燃料芯块表面质量检测等方面逐步应用。

在燃料棒缺陷检测方面,Gu等^[91]基于多尺度CNN,

实现了对燃料棒表面缺陷的自动化、智能化检测。在燃料芯块表面质量检测方面,国内 Zhang 等^[92]与 Li 等^[93]分别基于 CNN 构建了核燃料芯块表面裂纹检测系统;而国外西班牙开发的自动视觉检查系统对 8 种芯块缺陷类型实现了约 90% 的分类准确率^[94]。

除此之外,机器视觉在燃料棒两端槽的加工质量检测^[95],包覆燃料球的涂层厚度检测^[96]以及核燃料球的姿态检测^[97]等方面也进行了应用研究。

3.3.2 机器视觉定位

基于机器视觉的定位技术,作为非接触、非破坏性,且自动高效的模式,近年来在制造业中获得了显著的发展和应用。核燃料领域中,机器视觉定位技术在乏燃料贮存、燃料棒识别以及核电站换料辅助定位中均得到了应用。

程伟等^[98]提出了一种基于机器视觉的自动定位技术,显著的提升了定位试验的效率,减少了对人力的依赖,同时在乏燃料水池的异物防护和设备保护上展现了优异的性能。孟宇等^[99]开发了一套针对 CANDU 反应堆燃料棒识别与定位算法,能够精确识别燃料棒束,并准确判断其位姿。李豪等^[100]针对核电站换料过程中的定位需求,设计了一套基于机器视觉的换料辅助定位系统。

总之,目前机器视觉算法已经达到了相当成熟的水平,并已在核燃料的生产和运行过程中进行了广泛的研究,而未来应致力于将算法更广泛地部署在工业实际生产环境中。

4 人工智能在核燃料与材料领域发展趋势

基于其他领域人工智能技术的前沿进展和核燃料及材料领域当前的应用现状,从算法和应用 2 个层面总结了核燃料及材料应用人工智能的发展趋势。在算法层面,机器学习因其固有的黑盒属性限制了其在核燃料及

材料领域的进一步应用,因此需要提高机器学习模型的可解释性并分析模型的不确定性以提升模型的可靠性;核燃料及材料领域也面临数据量少的问题,如何减少高保真模拟和实验的次数并使用有限监督的数据构建深度学习模型是一个重要的研究方向。在应用层面,分别基于核燃料及材料的仿真和设计 2 方面开展了论述。此外,材料研发是科学和工程领域广泛存在的重要问题,目前已经诞生了材料性质通用预训练模型和自动化实验室等前沿研究成果,本节也探讨了将其用于核燃料及材料研发的前景。

4.1 机器学习模型的可解释性和不确定性研究

核燃料及材料领域的的数据通常存在数据量稀少,数据质量低的问题,传统方法建立的模型通常精度较低。尽管机器学习具有强大的非线性拟合能力,能建立精度更高的模型,但由于黑盒属性限制了其进一步的发展。列举了 3 种方法以提升模型的可靠性,如图 2 所示。

(1)物理和数据融合的机器学习。该方法集成了数据驱动和物理驱动的优点,不仅能提升模型的可解释性,还能降低数据量的需求。

(2)SHAP 分析。SHAP 分析是一种解释机器学习预测结果的方法,通过 SHAP 分析可以得知模型每 1 个输入特征对输出结果的影响,结合先验知识可一定程度验证模型是否符合物理规律^[48]。

(3)机器学习的不确定性量化。经典的不确定性量化方法为^[101]:贝叶斯神经网络和 MC-dropout。其基本思想是认为网络参数满足一个先验分布而非固定值,在给定数据集后最大化其后验分布。此外,还有深度集成方法^[102],针对时序问题的不确定性分析方法^[103]和共形预测方法^[104]等。

4.2 有限监督学习

深度学习技术在机器视觉和自然语言处理的成功依赖于庞大的有标签数据,但在科学问题中,高质量数据的

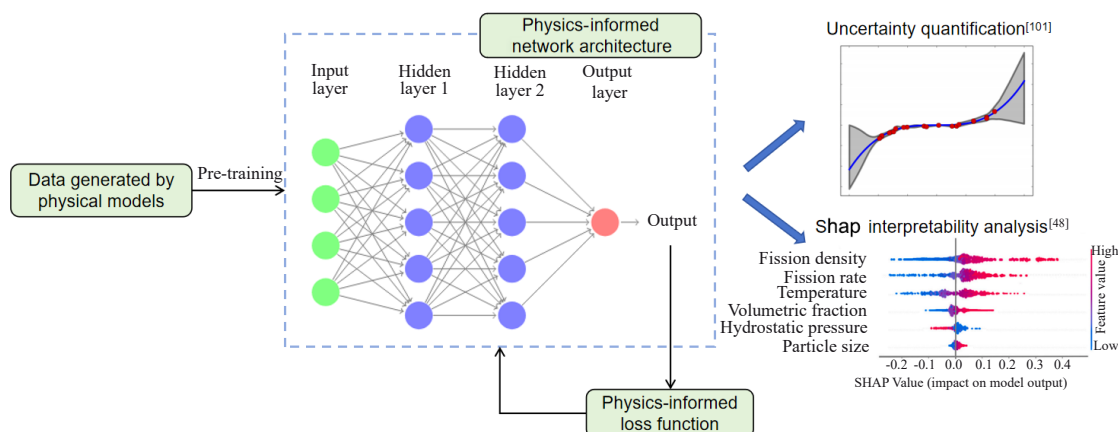


图 2 提高机器学习的可靠性方法

Fig.2 Methods for enhancing the reliability of machine learning^[48,101-104]

获得往往需要昂贵的经济和时间成本。特别是在核工程领域中,进行高保真的中子输运、计算流体力学或有限元计算所耗费的计算资源巨大;而获得辐照实验数据的时间和经济代价更大。因此,如何在有限监督条件下构建深度学习模型,降低其对有标签数据量的需求,是核燃料与材料领域应用深度学习技术亟待解决的问题。目前存在的方法有:混合保真数据建模、主动学习和半监督学习技术。

混合保真数据建模在工程领域有巨大的应用潜力。由于计算资源的限制,工程师们发展了一系列简化模型,以便在有限资源下分析物理系统的行为。以核工程领域为例,物理专业使用粗网结块法等数值方法减少网格数量,热工专业使用子通道程序替代CFD计算,而燃料专业则使用1.5维简化替代3维有限元计算。尽管这些低保真度数据不够精细和准确,但它们仍能大致反映物理系统的变化规律。充分利用大量易获取的低保真数据,配合少量高保真数据,有助于建立更精确的代理模型。当前混合保真数据建模通常对低保真模型结果进行缩放或偏移以校正^[105],进一步的工作考虑了低保真到高保真的非线性效应^[106]。此外,生成式模型也被用于科学仿真数据的生成,主要有2种策略:通过低保真模型数据训练扩散模型,再使用高保真模型数据微调^[107];通过生成模型建立低保真数据到高保真数据的映射^[108]。在生成过程中还可以加入物理方程的约束提高生成的质量。

主动学习是一种训练策略,它允许算法主动选择它认为最有助于模型学习的数据点进行标注和训练^[109]。例如在汽车领域,研究者Owoyele等^[110]开发了ActiveO算法用于内燃机的设计优化,以减少内燃机设计中的CFD模拟次数,加快设计流程。该算法融合了强学习器与弱学习器的预测结果,动态地在全局探索和局部搜索之间寻求平衡。在优化过程的早期阶段,它侧重于进行广泛的探索,以确保覆盖尽可能多的设计空间。随着优化的深入,算法逐渐将焦点转移到更优的局部区域,进行更为精细的搜索。这种策略显著降低了达到最优设计所需的模拟次数,提高了优化效率。

半监督学习是一种介于有监督学习和无监督学习之间的方法,其数据集通常包含少量的有标签数据和大量的无标签数据。这种方法的目标是结合这2种数据进行训练,以获得一个性能更优的模型。目前半监督学习方法主要有:一致性正则化方法、伪标签方法以及混合方法^[111],但主要应用于计算机视觉领域的分类任务中。张云阳等^[107]提出了基于一致性正则化以及自训练的半监督物理场代理模型构建方法,并将其应用在流体任务中。

4.3 多尺度多物理场核燃料仿真加速

虽然目前在核燃料各个尺度上的行为大多已经发展出了相应的数值方法进行模拟^[112],但目前的研究大多停

留在各个尺度行为的分析,难以实现跨尺度耦合,得到从微观材料结构到宏观材料性能的响应。实现跨尺度耦合的主要困难之一是低尺度模拟计算代价过大,例如使用DFT计算势函数的代价随着体系规模的增加而指数增长,而机器学习则提供了将多尺度建模变为现实的工具。在微观尺度上,深度势能方法^[6]依靠量子力学模型提供训练数据,用深度神经网络对高维势函数进行拟合,将其带入分子动力学计算,能够以从头计算的精度模拟数亿个原子的系统。在介观尺度上,深度材料网络^[113]依靠代表性体积元的有限元模拟提供训练数据,用基于物理知识设计的二叉树网络学习单质材料刚度矩阵和组分到复合材料整体刚度矩阵的映射,将其带入宏观有限元计算,能够以高精度模拟汽车大小的宏观结构。未来将借助机器学习技术进一步打通微观到介观,介观到宏观的多尺度模拟,将微观模型作为宏观模型的输入,通过组分和结构搜索算法直接实现从微观结构到宏观性能的设计。

核燃料的整体宏观行为呈现了多层级的特点。如反应堆堆芯由数百个燃料组件组成,一个燃料组件由数百个燃料元件组成,多层级的结构给宏观分析带来了困难。虽然当前大部分反应堆在设计时就尽量避免燃料元件之间的接触,因此元件之间的耦合关系较弱,只分析代表单元也具有一定合理性。但随着多种类型反应堆的发展,不可避免需要考虑燃料元件之间的作用。如弥散燃料的精细计算需要考虑颗粒与基体的相互作用,无定位格架的绕丝型或十字型燃料元件需要考虑元件间的接触。元件之间的作用会影响组件的行为,组件之间的相互作用又会影响堆芯的行为,模拟如此复杂的多尺度过程给现有的数值方法带来了挑战。对于弥散燃料的大规模精细计算,可参考深度材料网络,基于代表性体积元的模拟,学习颗粒分布和填充率到宏观性能的映射,将机器学习模型带入整体结构的有限元模拟中,从而实现弥散燃料元件级的精细模拟。对于元件级的相互作用,可考虑通过机器学习模型学习周围燃料元件对中心燃料元件的影响,通过局部学习的模型组合到更大的结构。

燃料性能同时也包含了多个物理场之间的作用。在燃料专业内部,需要考虑核燃料的辐照-热-力行为,在专业外部还需要考虑物理、热工和燃料等多个专业的耦合。不同的物理场的求解方式和时空分辨率不同,比如中子的模拟对象通常是整个堆芯,热工的模拟对象通常是多个流道或整个组件,燃料的模拟对象通常是单个核燃料元件。对于堆芯级多专业耦合,由于核燃料元件数量巨大,且高保真的核燃料性能模拟程序较为耗时,难以实现pin-by-pin的高保真模拟。通过机器学习技术有望突破该难题,具体而言,利用机器学习方法建立核燃料性能模拟程序的代理模型,耦合时用代理模型代替原来的程序加速计算。

4.4 拓扑优化与生成式设计

优化反应堆的结构设计是提升反应堆性能的关键手段之一。受限于制造技术,现有的核燃料元件一般为棒型、板型和球型等规则几何。而随着增材制造技术的发展,核燃料设计不必拘束于规则的几何设计,可以探索由传统或非传统材料制成更复杂的异形几何来改善反应堆的性能^[114]。异形堆芯的兴起必然需要相应的分析手段做支撑,而现有的研究中结构设计优化通常局限于形状优化和参数优化,优化空间较小,未来应借助拓扑优化和生成式设计技术探索更广阔的设计空间。

拓扑优化指根据给定的负载情况、约束条件和性能指标,在给定的区域内对材料分布进行优化的设计方法。拓扑优化的主要挑战之一是其高计算成本。而机器学习可以通过以下4种方式加速拓扑优化^[115]:(1)通过机器学习技术加速拓扑优化迭代过程^[116]。(2)通过机器学习直接预测拓扑优化的解^[117]。(3)设计空间降维。(4)改进优化算法参数调整策略。

生成式设计指利用机器学习技术,在给定一组约束和目标的前提下,生成众多设计选项。这种方法使工程师能够探索比传统方法更广阔的设计空间,更优化地适应了如3D打印这样的制造技术。工业设计的第1步是概念设计,当前诸如stable diffusion/midjourney等生成式AI工具可以帮助设计师从抽象的概念/词汇出发,生成高质量的渲染图,为设计师提供灵感。更进一步,AI可以处理工程级别的设计需求,直接输出设计的结构信息。具体而言,深度学习算法可以通过点云或者符号距离函数描述几何,然后通过迭代的过程,改变这些点的位置或符号距离函数的值,使得新生成的设计能够满足特定的性能目标,比如减少机翼的阻力,或者提高反应堆结构的核热力性能。生成式设计目前在结构设计^[26]和材料设计^[118]均已得到应用。

4.5 核材料通用预训练模型

材料性质的准确快速预测对于材料的设计至关重要。然而巨大的设计空间和多样化的运行条件为准确建模和预测材料性质带来了挑战。目前国际上已经开展了通用材料基础模型研究来加速材料的设计,相关研究有MatterSim^[119]和GNoME^[120]等。

微软研究院开发的MatterSim能预测元素周期表上广泛材料的性质,除了材料的基态结构、能量和材料的晶格动力学外,还能直接从结构预测宏观的热力学性质,适用于0~5000 K的温度和高达1000 GPa的压力条件。通过融合特定领域数据(3%~10%原始数据)进行微调,可用于更精细的材料模拟和性能预测。Google开发的GNoME基于48000个已知稳定晶体构建数据集,训练模型预测材料的稳定性,最终发现了220万个稳定的新材料。其中736个稳定材料已经被独立的实验验证,并发

现528个有前景的锂离子导体。

从以上研究来看,构建材料性质通用模型的关键包括:(1)基础数据集构建。数据集是训练神经网络的基础,可以通过第一性原理模拟产生数据和统计历史文献数据建立数据集。(2)引入物理信息的神经网络架构设计。目前用于构建预训练模型的结构主要以Transformer和GNN为主,并且设计时会引入物理系统的平移、置换或旋转不变性。(3)主动学习技术。主动学习技术使得模型能探索更宽广的材料设计空间、减少训练数据量并提升模型预测结果的性能。

目前核领域锆合金拥有较多数据,可参考其他领域模型构建方法或微调其模型,构建核领域锆合金性能预测模型,指导新一代核燃料包壳的研发。

4.6 核材料自动化实验室

核材料的研发迭代周期十分长,传统的研发范式通过试错的方法,效率十分低下,而通过人工智能建立材料自动化实验室将有助于加快核材料研发。

自动化实验室是一种集成了机器学习、实验室自动化和机器人技术的高科技平台,它能够执行一系列预编程或智能决策的实验操作,如试剂准备、反应合成、样品纯化、性能评估和数据分析,以实现自动化和智能化的科学探索,加速新材料和化合物的发现。自动化实验室实现了从实验制定、实验执行、获取数据,再决定下一组实验的闭环,使得科研人员能够专注于更高层次的科学问题,减少重复繁琐的实验任务。相关研究如A-Lab^[121]和SDLs^[122]。以A-Lab为例,其结合了计算、文献、历史数据、机器学习和主动学习来规划实验并解释实验结果。A-Lab首先使用Materials Project和DeepMind的数据筛选出58个目标材料,利用自然语言处理模型根据文献数据提出合成方案,通过基于热力学原理的主动学习方法优化合成方案。最终在机器人连续17天的操作中,A-Lab成功合成了58个目标中的41个新型化合物。

核领域的材料研发复杂度较高,特别是需要进行堆内辐照实验。因此,可以从堆外实验开始,逐步构建核材料自动化实验室。

5 结束语

随着人工智能技术的不断进步,其在核燃料及材料领域正逐渐展现出巨大的应用潜力和价值。本文综述了人工智能在核燃料和材料领域的研究现状,分别从材料级和整体级性能预测、材料和结构的设计以及生产制造和运行过程的机器视觉任务3方面开展了详细的论述。但目前的研究普遍停留在科研层面,并未给核燃料及材料领域带来生产力水平的显著提升。因此进一步展望了未来核燃料及材料领域与AI结合的发展趋势。在算法层面,需要增强机器学习模型可解释性并量化不确定性

以提高其可靠性。此外,利用有限监督学习技术可以显著减少训练模型的数据量,减少高保真模拟和实验的需求。在应用层面,结合其他领域的前沿研究成果重点讨论了核燃料及材料领域的多尺度多物理场仿真加速、拓扑优化与生成式设计、核材料性质通用预训练模型,以及自动化实验室等前沿技术。

总之,人工智能在核燃料及材料领域的应用前景广阔。为了推动人工智能技术的实际应用,需要在以下几个方面加强研究和合作:

(1)数据共享与标准化:建立统一的数据标准和共享平台,促进不同研究机构之间的数据交流和合作,为AI模型的训练提供更多的高质量数据。

(2)跨学科合作:加强计算机科学、材料科学、核工程等领域的跨学科合作,培养交叉学科复合型人才。

(3)工程验证与应用:提出一个可与AI结合的关键科学问题,满足普适性、重要性和可行性,并在实际应用中评估其有效性。

通过这些努力,人工智能技术有望在核燃料及材料领域发挥更大的作用,推动核能领域的科技进步。

参考文献 Reference

- [1] Wu Tailin(吴泰霖). *Chinese Journal of Computational Physics*(计算物理)[J], 2025, 42(2): 127
- [2] Deng Z W, Wang J, Liu H S *et al. Physics of Fluids*[J], 2023, 35(7): 075146
- [3] Bi K F, Xie L X, Zhang H H *et al. Nature*[J], 2023, 619: 533
- [4] Wu T L, Wang Q C, Zhang Y N *et al. Proceedings of the 28th ACM SIGKDD Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*[C]. New York: Computing Machinery, 2022: 4184
- [5] Jumper J, Evans R, Pritzel A *et al. Nature*[J], 2021, 596(7873): 583
- [6] Zeng J Z, Zhang D, Lu D H *et al. The Journal of Chemical Physics*[J], 2023, 159(5): 054801
- [7] Wang H C, Fu T F, Du Y Q *et al. Nature*[J], 2023, 620(7972): 47
- [8] Suman S. *Journal of Cleaner Production*[J], 2021, 278: 124022
- [9] Huang Q Y, Peng S N, Deng J *et al. Heliyon*[J], 2023, 9(3): 13883
- [10] Morgan D, Pilania G, Couet A *et al. Current Opinion in Solid State and Materials Science*[J], 2022, 26(2): 100975
- [11] Russell S J, Norvig P. *Artificial Intelligence: A Modern Approach* [M]. Pearson: Posts and Telecommunications Press, 2022: 1
- [12] Andersen B, Kropaczek D J. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2023, 155: 104518
- [13] Stewart R H, Palmer T S, Dupont B. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2021, 138: 103810
- [14] Zhang X Y, Liu M N, Liu Y Y *et al. Journal of Energy Storage*[J], 2024, 101: 113920
- [15] Zhang A, Lipton Z C, Li M *et al. Dive into Deep Learning*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2023: 3
- [16] Lu L, Jin P Z, Pang G F *et al. Nature Machine Intelligence*[J], 2021, 3(3): 218
- [17] Li Z, Huang D Z, Liu B *et al. Journal of Machine Learning Research*[J], 2023, 24(388): 1
- [18] Xiong W, Huang X M, Zhang Z Y *et al. Journal of Computational Physics*[J], 2024, 513: 113194
- [19] Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L *et al. Nature Reviews Physics*[J], 2021, 3(6): 422
- [20] Zhu S P, Wang L Y, Luo C Q *et al. Philos Trans a Math Phys Eng Sci*[J], 2023, 381(2260): 20220406
- [21] Raissi M, Perdikaris P, Karniadakis G E. *Journal of Computational Physics*[J], 2019, 378: 686
- [22] Satorras V G, Hoogeboom E, Welling M. *Journal of Machine Learning Research*[J], 2021, 139: 9323
- [23] Degraeve J, Felici F, Buchli J *et al. Nature*[J], 2022, 602(7897): 414
- [24] Radaideh M I, Du K, Seurin P *et al. Nuclear Engineering and Design*[J], 2023, 412: 112423
- [25] Ho J, Jain A N, Abbeel P. *Advances in Neural Information Processing Systems*[J], 2020, 33: 6840
- [26] Wu T L, Maruyama T, Wei L *et al. Proceedings of The Twelfth International Conference on Learning Representations*[C]. Vienna: ICLR Board, 2024
- [27] Chen H J, Yuan D W, Geng H Y *et al. Computational Materials Science*[J], 2023, 229(5): 112376
- [28] Zhang T, Jiao Y J, Liu Z H *et al. Progress in Nuclear Energy*[J], 2025, 186: 105769
- [29] Hagerman D L, Reymann G A. *MATPRO-Version 11: A Handbook of Materials Properties for Use in the Analysis of Light Water Reactor Fuel Rod Behavior*[R]. Idaho Falls: Idaho National Lab, 1979
- [30] Lu Y, Huang X Y, Ren Z Y *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2023, 583: 154553
- [31] Kautz E J, Hagen A R, Johns J M *et al. Computational Materials Science*[J], 2019, 161: 107
- [32] Xu F, Cai L, Salvato D *et al. Scientific Reports*[J], 2023, 13(1): 10616
- [33] Yang T X, Dou P. *Materials Characterization*[J], 2024, 211: 113886
- [34] Dutta S, Robi P S. *Metals and Materials International*[J], 2022, 28(12): 2884
- [35] Dutta S, Robi P S. *Mechanics of Time-Dependent Materials*[J], 2024, 28: 2963
- [36] Zhang X C, Gong J G, Xuan F Z. *International Journal of Fatigue*[J], 2021, 148: 106236
- [37] Sai N J, Sridharan K, Chauhan A. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2024, 177: 105418
- [38] Korotaev P, Yanilkin A. *Computational Materials Science*[J], 2025, 246: 113408
- [39] Jin M M, Cao P H, Short M P. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2019, 523: 189
- [40] Baydoun S, Fartas M, Fouvry S. *Tribology International*[J],

- 2023, 177: 107936
- [41] Park M J, Shin Y G, Almomani B *et al.* *Nuclear Engineering and Design*[J], 2024, 421: 113125
- [42] Zhang W Y, Wang X Y, Ai Y B *et al.* *Materials Today Communications*[J], 2024, 38: 107606
- [43] Zhang T, Jiao Y J, Liu Z H *et al.* *Nuclear Engineering and Technology*[J], 2025, 57(3): 103251
- [44] Craven G T, Chen R, Cooper M W *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2023, 23(25): 112442
- [45] Hasan T, Capolungo L, Mohammed Z. *npj Materials Degradation*[J], 2023, 7(1): 22
- [46] Che Y F, Wu X, Pastore G *et al.* *Annals of Nuclear Energy*[J], 2021, 153: 108046
- [47] Dhulipala S L, Shields M D, Chakroborty P *et al.* *Reliability Engineering & System Safety*[J], 2022, 226: 108693
- [48] Zhao Y M, Chen Z Y, Dong Y Q *et al.* *Materials Today Communications*[J], 2023, 37: 106998
- [49] Dubois E T, Tranchida J, Bouchet J *et al.* *Physical Review Materials*[J], 2024, 8(2): 025402
- [50] Stippell E, Alzate-vargas L, Subedi K N *et al.* *Artificial Intelligence Chemistry*[J], 2024, 2(1): 100042
- [51] Wang H, Pan X L, Wang Y F *et al.* *Journal of Nuclear Materials* [J], 2022, 572(15): 154029
- [52] Kruglov I A, Yanilkin A, Oganov A R *et al.* *Physical Review B* [J], 2019, 100(17): 174104
- [53] Kobayashi K, Okumura M, Nakamura H *et al.* *Scientific Reports* [J], 2022, 12(1): 9808
- [54] Hao M S, Guan P F. *Chinese Physics B*[J], 2023, 32(9): 098401
- [55] Wang H, Guo X, Zhang L F *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2019, 114(24): 244101
- [56] Ladygin V V, Korotaev P Y, Yanilkin A V *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2020, 172(1): 109333
- [57] Yang W, Ye J W, BI P *et al.* *Materials Today Communications*[J], 2024, 38: 107796
- [58] Koskenniemi M, Byggmästar J, Nordlund K *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2023, 577: 154325
- [59] Qi S M, Bo T, Zhang L F *et al.* *Artificial Intelligence Chemistry* [J], 2024, 2(1): 100027
- [60] Feng T X, Zhao J, Liang W S *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2022, 210: 111014
- [61] Wang J W, Ghosh D B, Zhang Z L. *Materials (Basel)*[J], 2023, 16(14): 4985
- [62] Hong Liang(洪亮), Jin Xin(金鑫), Liu Xiaohan(刘晓瀚) *et al.* *Journal of Shenzhen University(深圳大学学报)*[J], 2022, 39(5): 515
- [63] Wang Dongdong(王东东), Yang Hongyi(杨红义), Wang Duan(王端) *et al.* *Atomic Energy Science and Technology(原子能科学技术)*[J], 2020, 54(10): 1809
- [64] Wu H, Li R, Zhao P *et al.* *Frontiers in Energy Research*[J], 2022, 10: 852146
- [65] Liu Zhenhai(刘振海), Qi Feipeng(齐飞鹏), Zhou Yi(周毅) *et al.* *Nuclear Power Engineering(核动力工程)*[J], 2023, 44(S2): 1
- [66] Wei X Y, Wan J S, Zhao F Y. *Science and Technology of Nuclear Installations*[J], 2016(1): 4720685
- [67] Wang Y, Wei J, Wang J *et al.* *Journal of Nuclear Science and Technology*[J], 2020, 58(3): 333
- [68] Che Y F, Yurko J, Seurin P *et al.* *Annals of Nuclear Energy*[J], 2022, 168: 108905
- [69] Zhou W H, Robertson G, Sjöstrand H. *Annals of Nuclear Energy* [J], 2025, 211: 110893
- [70] Ross M, Lin T Y, Gould D *et al.* *Energies*[J], 2022, 15(11): 3895
- [71] Cui Zhuang(崔壮), Liu Manping(刘满平), Zeng Ying(曾迎) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2024, 53(8): 2375
- [72] Yan B J, Gao R, Liu P C *et al.* *International Journal of Heat and Mass Transfer*[J], 2020, 159: 120067
- [73] Tan F, Jiang Y B, Lei Q *et al.* *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2024, 31: 1326
- [74] He J Y, Li Z Z, Zhao P L *et al.* *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2024, 33: 260
- [75] Wen C, Zhang Y, Wang C *et al.* *Acta Materialia*[J], 2019, 170: 109
- [76] Bai B, Han X, Zheng Q *et al.* *Fusion Engineering and Design*[J], 2020, 161: 111939
- [77] Bai B, Han X, Wu S *et al.* *Mechanical Engineering Journal*[J], 2024, 11(2): 23
- [78] Bao Jiaming(包佳明), Bai Bing(白冰), Ke Yixuan(柯艺璇) *et al.* *Atomic Energy Science and Technology(原子能科学技术)*[J], 2024, 58(S1): 121
- [79] Zhang Xuewei(张雪伟), Kang Shidong(康世栋), Wang Zhaosong(王兆松) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2020, 49(11): 3835
- [80] Chen Chen(陈晨), Shao Zongyi(邵宗义), Meng Ying(孟莹) *et al.* *Atomic Energy Science and Technology(原子能科学技术)*[J], 2023, 57(S1): 157
- [81] Taheranpour N, Talebi S. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2021, 131: 103600
- [82] Ghasabian M, Talebi S, Safarzadeh O. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2021, 142: 103982
- [83] Ghasabian M, Talebi S, Safarzadeh O. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2023, 163: 104798
- [84] Tan J T, Li Q, Zhao B *et al.* *Annals of Nuclear Energy*[J], 2022, 169: 108914
- [85] Barati R. *Annals of Nuclear Energy*[J], 2014, 70: 56
- [86] Zhang C, Liu J M, Li X Q *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2023, 585: 154650
- [87] Raza W, Kim K Y. *Nuclear Engineering and Design*[J], 2008, 238(6): 1332
- [88] Leite V C, Schirru R, Neto M M. *Nuclear Technology*[J], 2018,

- 205(5): 637
- [89] Wan C F, Li W Q, Yang B *et al.* *Progress in Nuclear Energy*[J], 2024, 173: 105292
- [90] Sobes V, Hiscox B, Popov E *et al.* *Scientific Reports*[J], 2021, 11(1): 19646
- [91] Gu M F, Huang D G, Zhou X K *et al.* *Proceedings of the Seventh Asia International Symposium on Mechanics Lecture Notes in Electrical Engineering*[C]. Singapore: CIE, 2020: 927
- [92] Zhang B, Miao Y, Tian Y *et al.* *Journal of Nuclear Science and Technology*[J], 2021, 58(7): 787
- [93] Li F Y, Zhang B, Zhang F H *et al.* *Journal of Nuclear Science and Technology*[J], 2024, 61(12): 1600
- [94] Ramos A, Carrasco A, Fontanet J *et al.* *Nuclear Engineering and Design*[J], 2024, 417: 112842
- [95] Suo X Y, Liu J C, Dong L C *et al.* *Journal of Intelligent Manufacturing*[J], 2021, 33(6): 1649
- [96] Zhang Qiyu(张器宇). *Detection of Coated Particles Based on Machine Vision*(基于机器视觉的包覆球燃料颗粒检测)[D]. Changsha: Hunan University, 2020
- [97] Wang Yuanyuan(王媛媛). *Research on the Detection Technology of the Pose for Nuclear Fuel Ball Based on Machine Vision*(基于机器视觉的核燃料球姿态检测技术研究)[D]. Changsha: Hunan University, 2019
- [98] Cheng Wei(程伟), Wang Lei(王磊), Hu Jianhua(胡建华) *et al.* *Nuclear Power Engineering*(核动力工程)[J], 2020, 41(6): 198
- [99] Meng Yu(孟宇). *Research on Recognition and Location Algorithm of Nuclear Fuel Rod Based on Machine Vision*(基于机器视觉的核燃料棒识别与定位算法研究)[D]. Changsha: Hunan University, 2022
- [100] Li Hao(李豪). *Auxiliary Positioning System of Nuclear Power Plant Refueling Based on Machine Vision*(基于机器视觉的核电站换料辅助定位系统研究)[D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2021
- [101] Abdar M, Pourpanah F, Hussain S *et al.* *Information Fusion*[J], 2021, 76: 243
- [102] Lakshminarayanan B, Pritzel A, Blundell C. *Advances in Neural Information Processing Systems*[C]. California: NIPS Foundation, 2017: 30
- [103] Wu T L, Neiswanger W, Zheng H T *et al.* *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*[J], 2024, 38(1): 320
- [104] Romano Y, Patterson E, Candes E. *Advances in Neural Information Processing Systems*[C]. Vancouver: NIPS Foundation, 2019: 32
- [105] Song X G, Lv L Y, Sun W *et al.* *Structural and Multidisciplinary Optimization*[J], 2019, 60: 965
- [106] Lu L, Dao M, Kumar P *et al.* *Proceedings of the National Academy of Sciences*[J], 2020, 117(13): 7052
- [107] Zhang Yunyang(张云阳). *Research on Deep Learning Surrogate Modeling for Physical Fields with Limited Supervision*(有限监督条件下的物理场深度学习代理模型构建方法研究)[D]. Beijing: Academy of Military Sciences, 2024
- [108] Shu D L, Li Z J, Amir B F. *Journal of Computational Physics* [J], 2023, 478: 111972
- [109] Aggarwal C C, Kong X, Gu Q *et al.* *Active Learning: A Survey*[M]. New York: Chapman and Hall/CRC, 2014: 599
- [110] Owoyele O, Pal P. *Journal of Energy Resources Technology*[J], 2021, 143(3): 032307
- [111] Van J E, Hoos H H. *Machine learning*[J], 2020, 109(2): 373
- [112] Besmann T J, Dingreville R, Littlewood D *et al.* *State-of-the-Art Report on Multi-scale Modelling of Nuclear Fuels*[R]. Boulogne Billancourt: Nuclear Energy Agency, 2014
- [113] Wei H Y, Wu C T, Hu W *et al.* *Journal of Engineering Mechanics*[J], 2023, 149(3): 04023003
- [114] Betzler B R, Ade B J, Jain P K *et al.* *Nuclear Science and Engineering*[J], 2022, 196(12): 1
- [115] Shin S, Shin D, Kang N. *Journal of Computational Design and Engineering*[J], 2023, 10(4): 1736
- [116] Senhora F V, Chi H, Zhang Y Y *et al.* *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*[J], 2022, 398(1): 115116
- [117] Mazé F, Ahmed F. *Proceedings of the AAAI Conference on artificial intelligence*[J], 2023, 37(8): 9108
- [118] Zeni C, Pinsler R, Zügner D *et al.* *Nature*[J], 2025, 639: 624
- [119] Loew A, Sun D, Wang H C *et al.* *npj Computation Materials*[J], 2025, 11: 178
- [120] Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S *et al.* *Nature*[J], 2023, 624(7990): 80
- [121] Szymanski N J, Rendy B, Fei Y *et al.* *Nature*[J], 2023, 624(7990): 86
- [122] Abolhasani M, Kumacheva E. *Nature Synthesis*[J], 2023, 2(6): 483

Current Status and Development Trends of Artificial Intelligence in the Field of Nuclear Fuel and Materials

Zhang Tao, Jiao Yongjun, Liu Zhenhai, Qiu Xi, Xiang Yilong, Huang Haoyue, Lan Xun, Xin Yong, Li Yuanming
(State Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy Technology, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610213, China)

Abstract: With the rapid development of artificial intelligence (AI), its application in the field of nuclear fuel and materials is gradually becoming a new driving force for the advancement of nuclear energy technology. This article comprehensively reviews the current state of AI research in the field of nuclear fuel and materials and conducts an in-depth analysis of future development trends. It first introduces AI methods applied to scientific research, discussing from two aspects: network architecture and learning paradigms. Next it systematically summarizes the current state of AI applications in performance prediction at the material and structure levels of nuclear fuel materials, design optimization of materials and structures, and computer vision in fuel production and operation. The review then looks forward to the future development trends of the combination of AI with nuclear fuel and materials. At the algorithm level, it discusses methods to enhance the interpretability of machine learning models, quantify uncertainty, and the importance of limited supervised learning technology in reducing data requirements. At the application level, it discusses key technologies such as acceleration of multi-scale multi-physics field simulations, topological optimization and generative design, universal pre-trained models for nuclear material properties, and automated laboratories. Finally, several suggestions are proposed to further promote the application of AI in the field of nuclear fuel and materials.

Key words: nuclear fuel and materials; artificial intelligence; deep learning; nuclear fuel performance prediction; design optimization; machine vision

Corresponding author: Jiao Yongjun, Professor, State Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy Technology, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610213, P. R. China, Tel: 0086-28-85908275, E-mail: jiaoyongjun@npic.ac.cn